

智能科学技术著作丛书

协同进化计算与多智能体系统

焦李成 刘 静 钟伟才 著

国家自然科学基金重点项目资助

国家 863 计划资助

国家 973 计划资助

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是作者在自然计算领域中协同进化计算和多智能体系统研究方向上近几年研究成果的系统总结。在总结目前国内外该研究方向发展现状的基础上,本书着重介绍作者在这一方向的研究成果,主要包括:组织协同进化算法,协同进化多目标优化算法,智能体进化算法,宏智能体进化模型的构造、实现及其在大规模数据分类问题、SAT 问题、VLSI 布图规划问题、数值优化问题、组合优化问题、约束满足问题、约束布局优化问题、时延受限组播路由问题等领域中的应用。本书算法理论与应用实践并重,不但为相关协同进化计算和多智能体系统的研究者提供研究方法以资借鉴,而且更重要的是为计算智能的应用提供新的思路和方法。

本书可以为计算机科学、信息科学、人工智能自动化技术等领域从事自然计算、进化计算、协同进化计算、多智能体系统研究的相关专业技术人员提供参考,也可以作为相关专业研究生和高年级本科生教材。

图书在版编目(CIP)数据

协同进化计算与多智能体系统/焦李成,刘静,钟伟才著. —北京:科学出版社,2006

(智能科学技术著作丛书)

ISBN 7-03-017005-9

.协... .焦... 刘... 钟... .人工智能-信息处理 .TP183

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 019496 号

责任编辑:田士勇 耿建业 卜 新 / 责任校对:宋玲玲

责任印制:安春生 / 封面设计:陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006 年 9 月第 一 版 开本: B5(720 × 1000)

2006 年 9 月第一次印刷 印张: 20 1/4

印数: 1—3 000 字数: 382 000

定价: 48.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换 科印)

谨以此书献给我们的孩子小鱼儿！

——刘 静 钟伟才

庆祝人工智能诞生50周年

暨

中国人工智能学会成立25周年

吴文俊

《智能科学技术著作丛书》编委会

名誉主编： 吴文俊

主 编： 涂序彦

副 主 编： 钟义信 史忠植 何华灿 蔡自兴 孙增圻 童安齐 谭 民

秘 书 长： 韩力群

副秘书长： 田士勇

编 委：（按姓氏汉语拼音排序）

蔡庆生 (中国科技大学)

蔡自兴 (中南大学)

杜军平 (北京工商大学)

韩力群 (北京工商大学)

何华灿 (西北工业大学)

何 清 (中国科学院计算技术研究所)

黄河燕 (中国科学院计算语言研究所)

黄心汉 (华中科技大学)

焦李成 (西安电子科技大学)

李祖枢 (重庆大学)

刘 宏 (北京大学)

刘 清 (南昌大学)

秦世引 (北京航空航天大学)

邱玉辉 (西南师范大学)

阮秋琦 (北京交通大学)

史忠植 (中国科学院计算技术研究所)

孙增圻 (清华大学)

谭 民 (中国科学院自动化研究所)

田士勇 (科学出版社)

童安齐 (科学出版社)

涂序彦 (北京科技大学)

王国胤 (重庆邮电学院)

王家钦 (清华大学)

王万森 (首都师范大学)

吴文俊 (中国科学院系统科学研究所)

杨义先 (北京邮电大学)

尹怡欣 (北京科技大学)

于洪珍 (中国矿业大学)

张琴珠 (华东师范大学)

钟义信 (北京邮电大学)

庄越挺 (浙江大学)

《智能科学技术著作丛书》序

“智能”是“信息”的精彩结晶，“智能科学技术”是“信息科学技术”的辉煌篇章，“智能化”是“信息化”发展的新动向、新阶段。

“智能科学技术”(intelligence science & technology, 简称 IST)是关于“广义智能”的理论方法和应用技术的综合性科学技术领域,其研究对象包括:

- “自然智能”(natural intelligence, 简称 NI),包括:“人的智能”(human intelligence, 简称 HI)及其他“生物智能”(biological intelligence, 简称 BI)。

- “人工智能”(artificial intelligence, 简称 AI),包括:“机器智能”(machine intelligence, 简称 MI)与“智能机器”(intelligent machine, 简称 IM)。

- “集成智能”(integrated intelligence, 简称 II),即:“人的智能”与“机器智能”人机互补的集成智能。

- “协同智能”(cooperative intelligence, 简称 CI),指:“个体智能”相互协调共生的群体协同智能。

- “分布智能”(distributed intelligence, 简称 DI),如:广域信息网,分散大系统的分布式智能。

1956年,“人工智能”学科诞生,50年来,在起伏、曲折的科学征途上不断前进、发展,从狭义人工智能走向广义人工智能,从个体人工智能到群体人工智能,从集中式人工智能到分布式人工智能,在理论方法研究和应用技术开发方面都取得了重大进展。如果说,当年“人工智能”学科的诞生是生物科学技术与信息科学技术、系统科学技术的一次成功的结合,那么,可以认为,现在“智能科学技术”领域的兴起是在信息化、网络化时代又一次新的多学科交融。

1981年,“中国人工智能学会”(Chinese Association for Artificial Intelligence, 简称 CAAI)正式成立,25年来,从艰苦创业到成长壮大,从学习跟踪到自主研发,团结我国广大学者,在“人工智能”的研究开发及应用方面取得了显著的进展,促进了“智能科学技术”的发展。在华夏文化与东方哲学影响下,我国智能科学技术的研究、开发及应用,在学术思想与科学方法上,具有综合性、整体性、协调性的特色;在理论方法研究与应用技术开发方面,取得了具有创新性、开拓性的成果。“智能化”已成为当前新技术、新产品的发展方向和显著标志。

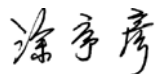
为了适时总结、交流、宣传我国学者在“智能科学技术”领域的研究开发及

应用成果，中国人工智能学会与科学出版社合作编辑出版《智能科学技术著作丛书》。需要强调的是，这套丛书将优先出版那些有助于将科学技术转化为生产力以及对社会和国民经济建设有重大作用和应用前景的著作。

我们相信，有广大智能科学技术工作者的积极参与和大力支持，以及编委们的共同努力，《智能科学技术著作丛书》将为繁荣我国智能科学技术事业、增强自主创新能力、建设创新型国家做出应有的贡献。

祝《智能科学技术著作丛书》出版，特赋贺诗一首：

智能科技领域广
人机集成智能强
群体智能协同好
智能创新更辉煌



中国人工智能学会荣誉理事长
2005年12月18日

前 言

让机器“听”懂人类的语言，“看”清文字图像，“会”讲话，这是人类一直努力的目标，智能计算与识别则是力图实现人类智能，包括视觉、听觉、触觉等能力和多媒体信息的非线性智能化处理。这也是跨世纪的信息科学与高技术的基本支撑点。由于它在国防与民用各个领域的巨大应用前景，因而受到世界各国的高度重视。

生命科学与工程科学的相互交叉、相互渗透和相互促进是近代科学技术发展的显著特点之一，而计算智能（包括神经网络、模糊逻辑、自然计算、进化计算等）的迅速发展也体现了科学发展的这一特征和趋势。国家自然科学基金委员会已将智能信息处理列为未来重点发展的五个方向之一。

生命从远古时代单细胞开始，历经环境变迁的磨难，经过了从低级到高级、从简单到复杂的演化之路，不但延续下来，而且产生了人类这种有思维、有智力的高级生命体。人类找到了生命的最佳结构与形式，不但可以被动地适应环境，而且能够通过学习、模仿与创造，不断提高自己适应环境的能力。

自从 19 世纪后半叶以来，人类正在将其模仿的范围延伸至自然界与人类自身。神经网络是人类对其思维方式的类比。除了自身结构学习以外，人类还可以向其自身的进化这一更为复杂的过程学习，以增强自己解决问题的能力，其代表性的方法就是进化计算。

人类之所以能够向其自身的进化学习以增强求解问题的能力，是因为自然进化过程本质上就是一个学习与优化的过程。这一优化过程的目的是使生命体达到适应环境的最佳结构与效果。

进化计算是一类模拟生物进化过程与机制求解问题的自组织、自适应人工智能技术。它起源于 20 世纪 60 年代 J. Holland 针对机器学习问题所提出的遗传算法（genetic algorithm）、I. Recenberg 和 H. P. Schwefel 用于数值优化问题的进化策略（evolutionary strategy）以及 L. J. Fogel 针对优化模拟系统所提出的进化规划（evolutionary programming）。

这类技术（算法）的核心思想源于这样的基本认识：生物进化过程（从简单到复杂、从低级到高级）本身是一个自然的、并行发生的、稳健的优化过程。这一优化过程的目标是对环境的自适应性，生物种群通过“优胜劣汰”及遗传变异来达到进化（优化）的目的。依达尔文的自然选择与孟德尔的遗传变异理论，生物的进化是通过繁殖、变异、竞争和选择这四种基本形式实现的。因而，如果把

待解决的问题理解为对某个目标函数的全局优化，则进化计算即是建立在模拟上述生物进化过程基础上的随机搜索优化技术。根据这一观点，遗传算法、进化策略与进化规划等均可被解释为进化计算的不同执行策略，各自从基因的层次和种群的层次实现对生物进化的模拟。

进化计算由于具有鲜明的生物背景和适用于任意函数类等特点，20 世纪 60 年代中期以来，引起众多领域的普遍关注，并被广泛应用于机器学习、人工神经网络训练、程序自动生成、专家系统的知识库维护等一系列超大规模、高度非线性、不连续、多峰函数的优化。

进化作为从生命现象中抽取的重要的自适应机制已经为人们所普遍认识和广泛应用，然而，现有的进化模型存在一个共同的不足，即未能很好地反映这样一个普遍存在的事实：在大多数情况下，整个系统复杂的自适应进化过程事实上是一个系统应多个子系统局部相互作用的协同进化过程，也就是说，它是大规模协同动力学系统。人们对此了解甚少，以前的工作大都注意从算法的角度认识问题。因此，对进化计算的认识机理了解还不多。如何反映进化的多样性、多层次性、系统性、自适应性、自组织过程、相变与混沌机理等则是有待解决的问题，这也是真正了解进化机理的困难和关键所在。

协同进化计算的研究已受到国内外学者的广泛关注，但总体上还处于一个起步阶段，目前还没有形成像进化算法一样的完整框架，这仍有待于我们做进一步的艰苦工作。本书在深入研究协同进化计算的基础上，从进化算法发展的根源和协同进化相互作用的角度反思协同进化计算，提出了组织协同进化算法和多智能体进化算法，介绍了协同进化算法的动力学系统，证明了算法的收敛性，分析了算法的计算复杂性。本书算法理论与应用实践并重，不但为相关协同进化计算研究者提供研究方法以资借鉴，而且更重要的是为计算智能的应用提供新的思路和方法。

近 5 年来，在国家自然科学基金重点项目（进化计算理论、方法与应用，60133010）、国家自然科学基金面上项目（组织协同进化分类与 VLSI 布图规划，60502043）等基金的资助下，我们对进化计算理论、算法及应用进行了较为系统的研究，尤其对协同进化计算、多智能体系统与进化计算的结合等进行了较为深入的探讨，共培养了 15 位博士，出站博士后 3 人。这部书正是我们研究工作的一个小结。

全书共 12 章，主要内容包括：进化计算、协同进化计算、复杂适应系统和多智能体系统的简介（第 1 章），组织协同进化算法及其在大规模数据分类、SAT 问题、数值优化问题中的应用（第 2~4 章），一种新的 VLSI 布图表示方法——移动模式序列及基于移动模式序列求解布图规划问题的组织进化算法和协同进化多目标优化算法（第 5~7 章），多智能体进化算法及其在超高维函数优化、组合优化、

约束满足问题、约束布局优化问题、时延受限组播路由问题中的应用(第 8、10~12 章), 宏智能体进化模型及其在可分解函数优化中的应用(第 9 章)。书中给出了主要算法和相应标准测试问题, 便于读者使用和研究。

本书是西安电子科技大学智能信息处理研究所近五年来工作的集体结晶。特别感谢保铮院士多年来的悉心培养和指导, 感谢中国科技大学陈国良院士和 IEEE 进化计算期刊主编、英国伯明翰大学姚新教授的指导和帮助, 感谢国家自然科学基金委员会信息科学部的大力支持, 感谢西安电子科技大学智能信息处理研究所全体成员付出的辛勤劳动。

感谢家人所给予的大力支持和理解。

由于作者水平有限, 书中不妥之处在所难免, 恳请读者批评指正。

作 者

2006 年 5 月 2 日

于西安电子科技大学

目 录

《智能科学技术著作丛书》序

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 从进化论到进化计算	1
1.1.1 现代进化论	1
1.1.2 生物进化与优化	3
1.2 进化计算	5
1.2.1 进化计算的主要分支	6
1.2.2 进化计算的数学基础	8
1.2.3 进化算法的收敛性理论	10
1.2.4 进化计算的应用	16
1.3 协同进化计算	17
1.3.1 协同进化的生物学基础	17
1.3.2 协同进化的动力学描述	21
1.3.3 协同进化算法的发展现状	23
1.4 复杂适应系统	26
1.4.1 复杂适应系统	26
1.4.2 复杂适应系统的适应性与生物进化过程	28
1.4.3 生物进化过程的数学模型	31
1.5 多智能体系统	34
1.5.1 智能体的基本概念	34
1.5.2 智能体形式化描述	37
1.5.3 多智能体系统的主要研究内容	40
1.5.4 面向问题解决的多智能体系统研究现状	43
1.5.5 多智能体系统与分布式人工智能	45
1.5.6 多智能体系统与人工生命	47
1.5.7 多智能体系统与进化计算	49
第 2 章 组织协同进化分类算法	52
2.1 分类问题与组织学习模型	52
2.2 用于分类的组织	54
2.3 组织适应度函数	57

2.4	组织协同进化分类算法	58
2.5	仿真实验比较研究	61
2.5.1	UCI 标准数据集	61
2.5.2	算法扩展性分析	62
2.6	算法实际应用	64
2.6.1	雷达一维像识别	64
2.6.2	遥感舰船目标识别	67
第 3 章	组织进化算法求解 SAT 问题	70
3.1	用于 SAT 问题的组织	70
3.2	组织进化算子设计	72
3.2.1	自学习算子	72
3.2.2	吞并算子	72
3.2.3	分裂算子	73
3.3	求解 SAT 问题的组织进化算法	74
3.4	仿真实验比较研究	77
第 4 章	组织进化数值优化算法	80
4.1	用于数值优化的组织	80
4.2	组织进化算子设计	81
4.2.1	分裂算子	81
4.2.2	吞并算子	82
4.2.3	合作算子	83
4.3	组织进化数值优化算法	84
4.4	收敛性证明	84
4.5	无约束优化仿真实验	87
4.5.1	OEA 的实验结果	88
4.5.2	OEA 与 FEP 和 OGA/Q 的比较	90
4.6	有约束优化仿真实验	91
4.6.1	OEA 与已有方法的性能比较	92
4.6.2	OEA 的实验结果	94
4.6.3	种群规模对 OEA 求解无约束优化性能的影响	95
4.7	参数机理研究	96
4.7.1	参数 AS 和 CS 对 OEA 性能的影响	97
4.7.2	参数 Max _{OS} 对 OEA 性能的影响	97
第 5 章	移动模式序列——一种新的 VLSI 布图表示方法	100
5.1	布图规划问题	100
5.2	矩形模块移动模式序列	102

5.2.1	移动模式序列的定义	102
5.2.2	移动模式序列到布局的转换算法	103
5.2.3	移动模式序列到布局转换算法的正确性与计算复杂度分析	108
5.3	直线边界模块移动模式序列	110
5.3.1	直线边界模块的信息表示结构	111
5.3.2	移动模式序列到布局的转换算法	112
5.3.3	移动模式序列到布局的转换实例	117
第 6 章	基于移动模式序列的组织进化算法	119
6.1	求解布图规划问题的组织定义	119
6.2	各类型模块形状的确定	119
6.3	组织进化算子设计	123
6.3.1	分裂算子	123
6.3.2	吞并算子	123
6.3.3	培训算子	125
6.4	基于移动模式序列的组织进化算法	126
6.5	仿真实验比较研究	127
6.5.1	硬矩形模块的布图规划实验	129
6.5.2	软矩形模块的布图规划实验	135
6.5.3	软矩形模块与硬直线边界模块混合的布图规划实验	138
第 7 章	协同进化多目标优化算法求解 VLSI 布图规划问题	140
7.1	多目标优化	140
7.1.1	多目标优化问题的起源与数学模型	141
7.1.2	经典的多目标进化算法	143
7.1.3	种群多样性	146
7.1.4	性能评价方法	147
7.2	协同进化多目标优化算法	148
7.2.1	适应度定义与选择机制	149
7.2.2	协同进化算子	150
7.2.3	算法描述	151
7.2.4	仿真实验比较研究	152
7.3	求解 VLSI 布图规划问题的协同进化多目标优化算法	156
7.3.1	协同进化算子设计	156
7.3.2	算法描述	160
7.3.3	仿真实验比较研究	161
第 8 章	用于超高维函数优化的多智能体遗传算法	165
8.1	用于函数优化的智能体	165
8.2	智能体遗传算子设计	167

8.2.1	邻域竞争算子	168
8.2.2	邻域正交叉算子	168
8.2.3	变异算子	170
8.2.4	自学习算子	170
8.3	多智能体遗传算法	171
8.4	收敛性证明	172
8.5	仿真实验比较研究	175
8.5.1	几个典型算法	176
8.5.2	30 维函数优化实验	177
8.5.3	20~1 000 维函数优化实验	177
8.5.4	1 000~10 000 维函数优化实验	180
8.6	线性系统逼近问题仿真实验	183
8.6.1	自适应伸缩搜索空间的方法	184
8.6.2	自适应遗传算法仿真实验	185
8.6.3	用于线性系统逼近的多智能体遗传算法	189
8.6.4	线性系统逼近问题仿真实验	191
第 9 章	可分解函数优化的宏智能体进化模型	194
9.1	可分解函数	194
9.2	宏智能体	195
9.3	宏智能体进化模型	196
9.4	层次多智能体遗传算法	198
9.4.1	算法描述	199
9.4.2	收敛性证明与时间复杂度分析	200
9.4.3	仿真实验比较研究	202
第 10 章	组合优化多智能体进化算法	205
10.1	用于组合优化的智能体	205
10.2	智能体的行为	206
10.2.1	竞争行为	207
10.2.2	自学习行为	207
10.3	组合优化多智能体进化算法	209
10.4	收敛性证明	210
10.5	欺骗问题仿真实验	213
10.5.1	强联结欺骗函数实验	214
10.5.2	弱联结欺骗函数实验	216
10.5.3	重叠联结欺骗函数实验	218
10.6	等级问题仿真实验	220

10.6.1	等级问题	220
10.6.2	实验结果	222
第 11 章	约束满足智能体进化算法	225
11.1	约束满足智能体	225
11.1.1	约束满足问题	225
11.1.2	约束满足智能体的定义	226
11.1.3	约束满足智能体的生存环境	229
11.2	约束满足智能体的行为	230
11.2.1	竞争行为	230
11.2.2	自学习行为	231
11.2.3	变异行为	232
11.3	约束满足智能体进化算法	232
11.4	算法复杂性分析	233
11.4.1	空间复杂度分析	233
11.4.2	收敛性证明	234
11.5	非排列式约束满足问题仿真实验	237
11.5.1	与经典算法的性能比较研究	238
11.5.2	算法参数机理分析	239
11.6	排列式约束满足问题仿真实验	242
11.6.1	n -皇后问题	242
11.6.2	实验结果	245
第 12 章	多智能体进化算法的实际应用	247
12.1	约束布局优化问题	247
12.1.1	问题描述	247
12.1.2	求解约束布局优化问题的多智能体遗传算法	249
12.1.3	仿真实验比较研究	249
12.2	时延受限组播路由问题	255
12.2.1	组播路由算法概述	255
12.2.2	搜索空间动态扩展的多智能体进化算法求解时延受限组播路由问题	261
12.2.3	仿真实验研究	266
参考文献		268
附录 A	第 4 章的 15 个无约束优化测试函数	282
附录 B	第 4 章的 13 个有约束优化测试函数	284
附录 C	图 6.2 布图结果对应的形状信息和移动模式序列	288
附录 D	图 6.3 布图结果对应的形状信息和移动模式序列	296
附录 E	图 6.4 布图结果对应的形状信息和移动模式序列	301

第 1 章 绪 论

1.1 从进化论到进化计算

在大约 34 亿年前地球上出现了生命。原始的生命并不具有细胞结构，后来才出现了少数单细胞的原始类型。这类生物在适当的条件下不断地分化、发展。一些进化到植物，另一些进化到动物直至人类^[1]。

任何生物都与其生活的环境相联系。许多绿草丛中的昆虫是绿色的，沙漠中的动物是沙黄色的，北极的动物是白色的，绿色植物的叶能够进行光合作用，脊椎动物眼的结构使其能很好地了解周围的情况，某些温泉里的藻类可忍耐 80℃ 的高温，沙漠中的节节木根系长 4~5m。这些都是奇妙的适应现象。生物的进化必然与环境相适应，否则就被淘汰。因为各种生物要生存下去就必须进行生存斗争。生存能力较强的生物容易生存下来，并有较多的机会产生后代；生存能力较低的生物则被淘汰，或者产生后代的机会越来越少，直至消亡。

生物进化论认为，地球上最早的生命物质是由非生命物质转化来的，现存的各种生物有着共同的祖先。在进化过程中，生物的种类由少到多，生物的结构和功能由简单到复杂，由低级到高级。把生物进化作为一门科学进行探讨，并首次提出系统进化学说的是法国博物学家拉马克^[2]。半个世纪后，即 1859 年，英国生物学家达尔文为之奠定了科学的基础^[3]，这标志着科学的生物进化论的诞生。此后，进化论又被奥地利学者孟德尔开创的遗传学补充和发展^[4]，终于发展成为现代的科学形态。

1.1.1 现代进化论

现代进化论的理论来源至少包括三方面的内容：拉马克进化学说、达尔文进化论和孟德尔遗传学。其主干则是达尔文进化论。

1. 拉马克进化学说

1809 年，拉马克出版了《动物哲学》^[2] 一书。此书首次提出并系统阐述了生物进化学说。拉马克认为：

(1) 一切物种都是由其他物种演变和进化而来的，生物的演变和进化是一个缓慢而连续的过程。

(2) 环境的变化能够引起生物的变异，环境的变化迫使生物发生适应性的进化。生物对环境的适应是发生变异的结果：环境变了，生物会发生相应的变异，

以适应新的环境。对于植物和无神经系统的低等动物来说，环境引起变异的过程是：环境→机能→形态构造。对于有神经系统的动物来说，环境引起变异的过程是：环境→需要→习性→机能→形态构造。

(3) 有神经系统的动物发生变异的原因，除了环境变化和杂交外，更重要的是用进废退和获得性状遗传。

(4) 生物进化的方向是从简单到复杂，从低等到高等。

(5) 最原始的生物起源于自然发生。各类生物并不起源于共同祖先。植物、各大类动物各有不同的起源。

拉马克建立了比较完整的生物体系，但他关于获得性遗传的法则始终无法得到现代科学的支持。

2. 达尔文进化论

自 1831 年，达尔文开始了为期 5 年的环球科学旅行。沿途，他仔细考察了各地的生物类型、地理分布、古生物化石和现存生物的相互关系、地质层次序。返英后，他研究了人工育种的经验，总结了生物学和人类学的最新成果，于 1859 年完成了《物种起源》^[3] 一书。与此同时，Wallace 发表了题为《论变种无限地离开其原始模式的倾向》的论文。他们提出的观点被统称为达尔文进化学说。其基本要点是：

(1) 生物不是静止的，而是进化的。物种不断变异，旧物种消失，新物种产生。

(2) 生物进化是逐渐和连续的，不会发生突变。

(3) 生物之间都有一定的亲缘关系，它们具有共同的祖先。这点与拉马克的多元论不同。

(4) 自然选择是变异的最重要的途径。生物过度繁殖，但是它们的生存空间和食物都是有限的，从而面对生存斗争。生存斗争包括种内斗争、种间斗争以及生物与自然环境斗争三个方面。同种群的不同个体之间具有不同变异，有些变异对生存有利，有些变异对生存不利。优胜劣汰，适者生存。

达尔文进化论的提出不但是生物学思想的革命，而且也是人类哲学思想的一次革命。达尔文的观点和拉马克的观点有许多相似之处。但达尔文摒弃了拉马克获得性遗传法则，认为获得性状对于进化并不重要，只有遗传的变异才具有明显的进化价值，变异在群体内遗传，产生了进化效应。

3. 孟德尔遗传学

几乎在达尔文提出进化论的同时，孟德尔正在默默地进行着豌豆杂交实验，他把实验结果总结为以下两条定律(德国植物学家 Correns 将这些定律概括为孟德尔定律)。

(1) 分离定律：纯质亲本杂交时，子一代所有个体都表现出显性性状，在子二代表现出分离现象，显性性状与隐性性状之比为 3:1。

(2) 自由组合定律（又称独立分配定律）：两对性状分离后，又随机组合，在子二代中出现自由组合现象，出现的全显性、一隐一显、一显一隐、全隐性之比为 9:3:3:1。

孟德尔的分离定律和自由组合定律表明，有深层次的遗传因子在控制着遗传过程。胚胎学家 Weismann 用 22 代连续切割小鼠尾巴而第 23 代小鼠尾巴仍然不变短的实验明确地否定了获得性遗传的观点。细胞遗传学家 Morgan 以果蝇为实验材料，研究了遗传性状的变化与染色体之间的关系，得到了比孟德尔实验更全面、更深刻的结果，于 1933 年创立了基因理论。按照孟德尔和 Morgan 的遗传学理论，遗传物质作为一种指令密码封装在每个细胞中，并以基因的形式排列在染色体上。每个基因有特殊的位置，并控制生物的某些特征。不同的基因组合产生的个体对环境的适应性不一样，通过基因杂交和突变可以产生对环境适应性强的后代。经过优胜劣汰的自然选择，适应值高的基因结构就得以保存下来，从而逐渐形成了经典的遗传学染色体理论，揭示了遗传和变异的基本定律。

遗传物质是细胞核中染色体上的有效基因，其中包括了大量的遗传信息。染色体上携带着关于生物性状的物质元素，生物体所表现出来的外在特征是对染色体构成的一种体现。生物的进化本质体现在染色体的改变和改进上，生物体自身形态的变换是染色体结构变化的表现形式。基因组合的特异性决定了生物体的多样性，基因结构的稳定性保证了生物物种的稳定性，而基因的杂交和变异使生物进化成为可能。生物的遗传是通过父代向子代传递基因来实现的，而这种遗传信息的改变决定了生物体的变异。

1.1.2 生物进化与优化^[5~7]

现代进化论所揭示的进化机制在本质上是一种鲁棒的搜索和优化过程。进化出的动植物种群在细胞、器官、个体和群体等多个不同层次上都表现出优化的复杂行为。生物物种在进化过程中所解决的各种问题具有混沌、偶然、暂态和非线性相互作用等特点，具有这样特点的问题正是传统优化方法所难以解决的。

现代进化论认为，只用种群上和物种内的少量统计过程就可以充分地解释大多数生命历史。这些过程就是繁殖、变异、竞争和选择。这些过程构成了生物进化的四个要素。

(1) 繁殖。生命的持续是通过繁殖作用实现的。最初出现的是无性繁殖，但在无性繁殖中上代和下代之间只有信息的复制，而没有不同信息的交流，无法促使进化。所以生物界更为普遍存在的繁殖方式是有性繁殖，尤其在动物界更为普遍。有性繁殖中发生 DNA 的分割和交换，从而进行了基因信息交换。有性繁殖对于物种进化的显著优点是，与无性的孤雌繁殖相比，明显增加了对于基因/表现空间的探测速率，特别是在变化的环境下。

(2) 变异。变异指的是同种生物世代之间或同代不同个体之间的差异。这里我们感兴趣的是能遗传的变异，因为只有遗传变异才能作为进化的材料。生物体的遗传变异，在细胞核分子水平上主要表现为突变。突变可分为三类：① 基因突变，是指在核酸上仅有一个核苷酸改变的突变；② 染色体突变，是指染色体数目、大小和结构的改变；③ 基因重组，是通过有性过程实现的，包括连锁互换、自由组合和转座因子。

(3) 竞争。生存竞争是指生物与环境所发生的关系，这种关系包括：种内斗争、种间斗争、生物与自然环境斗争三个方面。产生生存斗争的重要原因在于生物的高度繁殖力。一切生物都有高速率增长的倾向，而地球上的食物和空间都有限，这必然引起竞争。生存斗争在同种个体之间最为剧烈。由于它们对于食物和空间等生存条件的要求最为相似，而生活环境的资源又有限，因此同种个体之间的斗争在程度上明显比异种个体之间的斗争更激烈。生存竞争的结果是适者生存，不适者淘汰。适者不仅获得生存的机会，而且所繁殖的后代将提高其种群的品质。

(4) 选择。自然选择学说是达尔文进化论的核心。自然选择是指适合于环境的生物被保留下来，而不适合的则被淘汰的现象。自然选择是在生存斗争中实现的，它通过对微小的有利变异的积累而促进生物进化。选择的作用集中表现在对群体中基因频率的影响，但是自然选择并不直接作用在基因型上，而是直接作用在表现型上。选择压力是指在两个基因频率之间一个比另一个更能生存下来的优势。在选择压力增大的情况下，环境发生剧烈的变化，生存斗争不断加剧，严重冲击着生物的正常生活，导致物种大量死亡。同时出现少量新的突变类型，它们成为进化出来的新物种。

总而言之，繁殖是所有生命的共同特征；变异保证了任何生命系统能在正熵世界中连续繁殖自己；对于限制在有限区域中的不断膨胀的种群来说，竞争和选择是不可避免的。于是进化就是这四个相互作用的随机过程一代一代地作用在种群上的结果。

个体和物种一般被认为是分别对应于它们的遗传编码和遗传编码所表现出来的行为特性。个体的遗传编码通常被称为基因型 (genotype)，而表现出来的行为被称为表现型 (phenotype)。基因型为进化过程中所获信息的存储提供了一种机制。由于多效性 (pleiotropy) 和多基因性 (polygeny) 这两种机制的存在和广泛应用，遗传上的变化所导致的结果一般来说是不可预料的。所谓多效性指的是一个单一基因可以同时多个表现型特征产生作用，而多基因性指的是单一的表现型特征可能由多个基因共同的相互作用所确定。在自然进化系统中，极少存在一个基因与一个行为特征之间的一一对应关系。表现型的变化实际上是基本遗传结构和现有的环境条件之间相互作用的一个复杂非线性函数。就像不同的计算机程序可以实现相同的功能一样，不同的遗传结构可以对应于相同的行为特征。进化过程的

选择机制直接作用于个体和物种的表现型上，而并不是直接作用于基因型上。

根据上述观点，生物进化显然是一种求解优化问题的过程。给定了初始条件和环境约束，通过选择可以得到与最优解尽可能接近的表现型。但是环境又持续不断地变化着，物种跟在环境变化的后面，不断地向一个新的最优解进化。这就是进化计算这类模拟自然进化的计算方法的思想源泉。以生物进化过程为基础，计算科学学者提出了各种模拟形式的计算方法。

1.2 进化计算

进化计算 (evolutionary computation, EC) 是一类模拟生物进化过程与机制来求解问题的自适应人工智能技术。它的核心思想源于这样的基本认识：从简单到复杂、从低级到高级的生物进化过程本身是一个自然的、并行发生的、稳健的优化过程，这一过程的目标是对环境的适应性，生物种群通过“优胜劣汰”及遗传变异来达到进化的目的。

这类算法就称为进化算法 (evolutionary algorithm, EA)，是基于这种思想发展起来的一类随机搜索技术。它们模拟由个体组成的群体的学习过程，其中每个个体表示给定问题搜索空间的一点。进化算法从选定的初始解出发，通过不断迭代的进化过程逐步改进当前解，直至最后搜索到最优解或满意解为止。在进化过程中，算法在一组解上，采用类似于自然选择和有性繁殖的方式，在继承原有优良基因的基础上，生成具有更好性能指标的下一代解的群体。

采用进化算法求解优化问题的一般步骤为：

- (1) 随机给定一组初始解。
- (2) 评价当前这组解的性能。
- (3) 若当前解满足要求或进化过程达到一定代数，计算结束。
- (4) 根据(2)的评价结果，从当前解中选择一定数量的解作为基因操作对象。
- (5) 对所选择的解进行基因操作（如交叉、变异等），得到一组新解，转到(2)。

目前搜索方法可以分成三类——枚举法、解析法和随机法。枚举法是指枚举出可行解集合内的所有可行解，以求精确最优解。对于连续函数，需对其进行离散化处理。但许多实际问题所对应的搜索空间很大，因此该方法的求解效率非常低。解析法在求解过程中主要使用目标函数的性质，如一阶导数、二阶导数等。这一方法又可以分为直接法与间接法。直接法根据目标函数的梯度来确定下一步搜索的方向，从而难于找到整体最优解，而间接法则从极值的必要条件出发导出一组方程，然后求解方程组。但是导出的方程组一般是非线性的，它的求解是非常困难的。随机法在搜索过程中对搜索方向引入随机的变化，使得算法在搜索过程中以较大的概率跳出局部极值点。随机法又可分为盲目随机法和导向随机法。

前者在可行解空间中随机地选择不同的点进行检测；后者以一定的概率改变当前的搜索方向，在其他方向上进行搜索。

进化算法属于一种随机搜索方法，它在初始解生成以及选择、交叉与变异等遗传操作过程中，均采用了随机处理方法。与传统搜索算法相比具有以下不同点：

- (1) 进化算法不直接作用在解空间上，而是利用解的某种编码表示；
- (2) 进化算法从一个群体即多个点而不是一个点开始搜索，这是它能以较大概率找到整体最优解的主要原因之一；
- (3) 进化算法只使用解的适应性信息（即目标函数值），并在增加收益和减少开销之间进行权衡，而传统搜索算法一般要使用导数等其他辅助信息；
- (4) 进化算法使用随机处理方法而不是确定性的转移规则。

进化算法和传统的算法相比最主要的特点体现在以下两个方面：

(1) 智能性。进化算法的智能性包括自组织、自适应和自学习等。应用进化算法求解问题时，在确定了编码方案、适应值函数和遗传算子后，算法将利用进化过程中获得的信息自行组织搜索。进化算法的这种智能性特征同时赋予了它具有根据环境的变化自动发现环境的特性和规律的能力。

(2) 本质并行性。进化算法的本质并行性表现在两个方面：一是进化算法是内在并行的，即进化算法本身非常适合大规模并行。二是进化算法的内涵并行性，由于进化算法采用种群的方式组织搜索，因而它可以搜索解空间内的多个区域，并相互交流信息。

1.2.1 进化计算的主要分支

目前研究的进化算法主要有四种^[8~18]：遗传算法（genetic algorithm, GA）、进化规划（evolutionary programming, EP）、进化策略（evolution strategy, ES）和遗传编程（genetic programming, GP）。前三种算法是彼此独立发展起来的，最后一种是在遗传算法的基础上发展起来的一个分支。虽然这几个分支在算法的实现方面具有一些细微差别，但它们具有一个共同的特点，即都借助生物进化的思想和原理来解决实际问题。

1. 遗传算法

遗传算法的创始人是美国密歇根大学的Holland教授。Holland教授在20世纪50年代末期开始研究自然界的自适应现象，并希望能够将自然界的进化方法用于实现求解复杂问题的自动程序设计。Holland教授认为：可以用一组二进制串来模拟一组计算机程序，并且定义了一个衡量每个“程序”正确性的度量——适应值。Holland教授模拟自然选择机制对这组“程序”进行“进化”，直到最终得到一个正确的“程序”。1967年，Bagley发表了关于遗传算法应用的论文^[9]，在其论文中首次使用了“遗传算法”来命名Holland教授所提出的“进化”方法。70年代初，

Holland教授提出了遗传算法的基本定理——模式定理，从而奠定了遗传算法的理论基础。模式定理揭示出群体中的优良个体的样本数呈指数级增长的规律。1975年，Holland教授总结了自己的研究成果，发表了在遗传算法领域具有里程碑意义的著作——《自然系统和人工系统的适应性》^[8]。在这本书中，Holland教授为所有的适应系统建立了一种通用理论框架，并展示了如何将自然界的进化过程应用到人工系统中去。Holland教授认为，所有的适应问题都可以表示为“遗传”问题，并用“进化”方法来解决。80年代，Holland教授实现了第一个基于遗传算法的机器学习系统——分类器系统，开创了遗传算法机器学习的新概念^[10]。

1975年，De Jong在其博士论文中结合模式定理进行了大量纯数值函数优化计算实验，建立了遗传算法的工作框架，得到了一些重要且具有指导意义的结论。De Jong还构造了五个著名的De Jong测试函数^[11]。1989年，Goldberg出版了专著《搜索、优化和机器学习中的遗传算法》^[12]。该书系统总结了遗传算法的主要研究成果，全面而完整地论述了遗传算法的基本原理及应用，奠定了现代遗传算法的科学基础。1991年，Davis编辑出版了《遗传算法手册》一书^[13]，该书包括了遗传算法科学计算、工程技术和社会经济中的大量应用实例，对推广和普及遗传算法起到了重要的作用。

标准遗传算法具有以下主要特点：

(1) 遗传算法必须通过适当的方法对问题的可行解进行编码。解空间中的可行解是个体的表现型，它在遗传算法的搜索空间中对应的编码形式是个体的基因型。

(2) 遗传算法基于个体的适应度来进行概率选择操作。

(3) 在遗传算法中，个体的重组使用交叉算子。交叉算子是遗传算法所强调的关键技术，它是遗传算法中产生新个体的主要方法，也是遗传算法区别于其他进化算法的一个主要特点。

(4) 在遗传算法中，变异操作使用随机变异技术。

(5) 遗传算法擅长对离散空间的搜索，它较多地应用于组合优化问题。

遗传算法除了上述基本形式外，还有各种各样的变形，如溶入退火机制^[19~21]、结合已有的局部寻优技巧^[22~24]、并行进化机制^[25~30]、协同进化机制^[31~33]等。退火型遗传算法、Forking遗传算法、自适应遗传算法、抽样型遗传算法、协作型遗传算法、混合遗传算法、实数编码遗传算法、动态参数编码遗传算法等较为典型^[34~44]。

2. 进化规划

20世纪60年代中期，Fogel等为有限状态机的演化提出了利用进化规划来求解预测问题^[15]，这些机器的状态变化表示通过在对应的离散、有界集上进行一致随机变异来修改。进化规划根据被正确预测的符号数来度量适应度。通过变异，父代群体中的每个机器产生一个子代，父代和子代中最好的那一半被选择生存下

来。90年代, Fogel又将进化规划的思想拓展到实数空间^[16], 使其能够用来求解实数空间中的优化计算问题, 并在其变异运算中引入正态分布技术, 这样, 进化规划就演变成一种优化搜索算法, 并在很多实际领域得到了应用^[45~51]。

进化规划主要具有下面几个特点:

- (1) 进化规划不使用个体重组方面的操作算子, 如不使用交叉算子。
- (2) 进化规划中的选择运算着重于群体中个体间的竞争选择。
- (3) 进化规划直接以问题的可行解作为个体的表现形式, 无需对个体进行编码, 也无需考虑随机扰动因素对个体的影响, 便于应用。
- (4) 进化规划以 n 维实数空间上的优化问题为主要处理对象。

3. 进化策略

进化策略是 20 世纪 60 年代由德国的 Rechenberg 和 Schwefel 首先提出的一种优化算法^[17]。当初主要用于处理流体动力学问题, 如弯管流体动力学优化。进化策略主要用于求解多峰非线性函数的优化问题。随后, 人们根据算法的不同选择操作机制提出了多种进化策略, 如 $(1+1)$ -ES、 $(1+\mu)$ -ES、 $(\mu+\lambda)$ -ES、 (μ, λ) -ES 等^[52~58]。

进化策略主要具有下面几个特点:

- (1) 进化策略以 n 维实数空间上的优化问题为主要处理对象。
- (2) 进化策略的个体中含有随机扰动因素。
- (3) 进化策略中个体的适应度直接取为它所对应的目标函数值。
- (4) 个体的变异运算是进化策略中所采用的主要搜索技术, 而个体间的交叉运算只是进化策略中所采用的辅助搜索技术。
- (5) 进化策略中的选择运算是按照确定的方式进行的, 每次都是从群体中选取最好的几个个体, 将它们保留在下一代群体中。

4. 遗传编程

1992 年, Koza 将遗传算法应用于计算机程序的优化设计及自动生成, 提出了遗传编程的概念^[18], 并成功地将遗传编程方法应用于人工智能、机器学习、符号处理等方面。遗传程序设计采用遗传算法的基本思想, 但使用一种更为灵活表示方式——分层结构来表示解空间。这些分层结构的叶节点是问题的原始变量, 中间节点则是组合这些原始变量的函数。遗传程序设计即是使用一些遗传操作动态地改变这些结构以获得解决问题的可行的计算机程序。

由于遗传程序设计采用一种更自然的方式, 使得其应用领域非常广泛, 不仅可以演化计算机程序, 而且可以演化任何复杂的系统^[59~63]。

1.2.2 进化计算的数学基础

自从模拟生物进化过程进行问题求解取得成功以来, 人们就试图对其进行理论分析以解释它为什么有效。Holland^[8]和 Goldberg^[12] 为解释进化算法的功效而建

立了基于模式分析的模式定理、隐含并行性定理以及积木块假设。下面我们遗传算法为例，阐述上述定理和假设。

1. 模式定理

定义 1.1 设遗传算法中的个体 $p \in \{0, 1\}^l$ ，则记集合 $S = \{0, 1, *\}^l$ 为一个模式 (schemata)。其中，* 为通配符。

定义 1.2 若一个个体 p 的每一位与模式 s 相匹配，则称 p 是 s 的一个表示。

定义 1.3 一个模式 s 的阶就是出现在模式中的“0”和“1”的数目，记为 $o(s)$ 。

定义 1.4 一个模式 s 的长度就是模式中第一个确定位置和最后一个确定位置间的距离，记为 $\delta(s)$ 。

假定在给定的时间步 t ，一个特定的模式 s 在种群 $P(t)$ 中包含有 m 个代表串，记为 $m = m(s, t)$ 。经过交叉、变异和选择操作后，则在种群 $P(t+1)$ 中，模式 s 的代表串的数量期望值为

$$E[m(s, t+1)] = m(s, t) \frac{\bar{f}(s)}{\bar{f}} \left[1 - p_c \frac{\delta(s)}{l-1} - o(s)p_m \right] \quad (1.1)$$

其中， $\bar{f}(s)$ 表示模式 s 在 t 时刻的所有代表串的适应值的均值，称为模式 s 的适应值； \bar{f} 表示种群 $P(t)$ 中所有个体的适应值的平均值； p_c 和 p_m 分别表示交叉和变异概率。

由(1.1)式有以下定理：

定理 1.1 即模式定理。适应值在种群平均适应值之上的、长度较短的、低阶的模式在遗传算法的迭代过程中将按指数增长率被采样。

模式定理告诉我们，遗传算法根据模式的适应值、长度和阶次来为模式分配搜索次数。为那些适应值较高、长度较短、阶次较低的模式分配的搜索次数按照指数率增长，而为那些适应值较低、长度较长、阶次较高的模式分配的搜索次数按照指数率衰减。

2. 隐含并行性定理

在长度为 l 、规模为 n 的群体中，包含了 $2^l \sim (n \times 2^l)$ 个不同的模式。所以每进行一次迭代所处理的模式数目往往远远大于个体数目。Holland 教授将遗传算法的这个特性称为隐含并行性。Goldberg 教授证明了以下定理：

定理 1.2 即隐含并行性定理。设 $\varepsilon \in (0, 1)$ 是一个很小的数， $l_s < \lceil (l-1) \cdot \varepsilon \rceil + 1$ ，群体规模为 $N = 2^{l/2}$ ，则遗传算法在一次迭代中所处理的“存活率”大于 $(1-\varepsilon)$ 的模式数约为 $O(N^3)$ 。其中，符号“ $\lceil \cdot \rceil$ ”表示向上取整。

隐含并行性定理反映出遗传算法对空间的搜索效率是非常高的，它对种群进行一次处理就处理了 $O(N^3)$ 个模式。同时，隐含并行性定理反映出遗传算法存储空间信息的能力也是很强的，每个种群中存储了 $O(N^3)$ 个模式的信息。

3. 积木块假设

定义 1.5 具有高适应值、长度短、低阶的模式称为积木块 (building block)。

正如搭积木块一样, 这些“好”的模式在遗传操作下相互拼搭、结合, 产生适应值较高的串, 从而找到更优的可行解, 这正是积木块假设所揭示的内容。

假设 1.1 即积木块假设。高于平均适应值、长度短、低阶的模式 (积木块) 在遗传算子作用下, 相互结合, 能生成高于平均适应值、长的、高阶的模式, 可最终生成全局最优解。

模式定理保证了较优的模式样本数呈指数级增长, 从而满足了寻找最优解的必要条件, 即遗传算法存在着寻找到全局最优解的可能性。而积木块假设则指出, 遗传算法具有寻找到全局最优解的能力, 即积木块假设在遗传算子的作用下, 能生成高于平均适应值的、长的、高阶的模式, 最终生成全局最优解。

1.2.3 进化算法的收敛性理论

到目前为止, 还没有一套完整的理论可以准确、全面地阐明一般进化算法的收敛性, 从而对其在大量应用中所表现出的全局优化能力做出理论解释。本节简单介绍已有的进化算法收敛性。首先给出收敛性的定义。

定义 1.6 设 Z_t 为 t 时刻种群中所包含个体的适应值的最大值, f^* 为适应值函数 $f(x)$ 在所有可能的个体所组成的集合 X 中所取得的最大值。若 Z_t 满足

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P\{Z_t = f^*\} = 1 \quad (1.2)$$

则称算法收敛到最优解。

1. 基于压缩映射原理的收敛性分析^[14]

定义 1.7 设 X 是一个非空集合。若 d 是一个 $X \times X$ 到 R 的映射, 并且对于 $\forall x, y, z \in X$ 满足以下条件, 则称 d 为 X 上的度量或距离函数, 称 (X, d) 为度量空间。

(1) $d(x, y) \geq 0$, 并且 $d(x, y) = 0$, 当且仅当 $x = y$;

(2) $d(x, y) = d(y, x)$;

(3) $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y)$ 。

定理 1.3 在度量空间 (X, d) 中:

(1) 对于 $\forall x, y, z \in X$, 有 $|d(x, z) - d(y, z)| \leq d(x, y)$;

(2) 对于 $\forall x, y, x_1, y_1 \in X$, 有 $|d(x, y) - d(x_1, y_1)| \leq d(x, x_1) + d(y, y_1)$ 。

定义 1.8 设 (X, d) 为度量空间, $\{x_n\}$ 是 (X, d) 中的序列。若存在正整数 N , 使得对一切 $n > N$, 有 $d(x_n, x) < \varepsilon$, 则称序列 $\{x_n\}$ 在 (X, d) 中收敛于 x , x 称为 $\{x_n\}$ 的极限, 记为 $x_n \rightarrow x$ 。

定义 1.9 设 (X, d) 为度量空间, $\{x_n\}$ 是 (X, d) 中的序列。若对于 $\forall \varepsilon > 0$, 存在正整数 N , 使得对一切 $m, n > N$, 则有: $d(x_m, x_n) < \varepsilon$, 序列 $\{x_n\}$ 是 (X, d) 中的 Cauchy 序

列。若 (X, d) 中的每一个Cauchy序列都收敛, 则 (X, d) 为完备度量空间。

定义 1.10 设 (X, d) 为度量空间, 对于映射 $f: X \rightarrow X$, $\exists \varepsilon \in [0, 1)$, 使得对于 $\forall x, y \in X$ 满足

$$d[f(x), f(y)] \leq \varepsilon d(x, y) \quad (1.3)$$

则称 f 为压缩映射。

定理 1.4 即Banach压缩映射定理。设 (X, d) 为完备度量空间, $f: X \rightarrow X$ 为一压缩映射, 则 f 有且仅有一个不动点 x^* , 并且对于 $\forall x_0 \in X$ 满足

$$x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} f^k(x_0) \quad (1.4)$$

其中, $f^{k+1}(x_0) = f[f^k(x_0)]$ 。

我们知道, 进化算法是一个迭代过程。若用 X 表示所有可能出现的种群的集合, 记 t 时刻的种群为 x_t , 将进化操作设为映射 $f: X \rightarrow X$, 则进化算法过程可表示为 $x_{k+1} = f(x_k)$ 。若存在一个点 $x^* \in X$, 使得 $x^* = f(x^*)$, 则进化算法收敛于 x^* 。

2. 基于有限Markov链的收敛性分析^[64]

定义 1.11 设 $\{x_t: t=0, 1, 2, \dots\}$ 是值域为可列状态空间 S 的随机变量, 若 $x_{k+1}=s_{ik+1}$, $s_{ik+1} \in S$ 的概率只与 x_k 有关, 而与 $x_{k-1}, x_{k-2}, \dots, x_0$ 无关, 即

$$P\{x_{k+1} = s_{ik+1} | x_0 = s_{i0}, x_1 = s_{i1}, \dots, x_k = s_{ik}\} = P\{x_{k+1} = s_{ik+1} | x_k = s_{ik}\} \quad (1.5)$$

则称 $\{x_t: t=0, 1, 2, \dots\}$ 为一个Markov链。记 $p_{ij} = P\{x_{k+1} = s_{ik+1} | x_k = s_{ik}\}$ 为从状态 s_{ik} 到状态 s_{ik+1} 的一步转移概率, 简称转移概率。称 $p_{ij}^m = P\{x_{k+m} = j | x_k = i\}$ ($i, j \in S$)为 m 步转移概率。

定义 1.12 若 $\{x_t: t=0, 1, 2, \dots\}$ 为Markov链, 其状态空间为有限集合: $S = \{s_1, s_2, \dots, s_n\}$, 则称 $\{x_t: t=0, 1, 2, \dots\}$ 为有限Markov链。

定义 1.13 若对于Markov链 $\{x_t: t=0, 1, 2, \dots\}$, 满足 $P\{x_{k+1} = j | x_k = i\} = p_{ij}$, 即状态 i 转变到状态 j 的概率与时间 t 无关, 则称 $\{x_t: t=0, 1, 2, \dots\}$ 为齐次Markov链。齐次Markov链的转移概率可以记为矩阵 \mathbf{P} , 其元素 p_{ij} 为由状态 i 到状态 j 的转移概率。

定义 1.14 对于一个 $n \times n$ 的方阵 \mathbf{A} :

(1) 若 $a_{ij} \geq 0, \forall i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$, 则称 \mathbf{A} 是非负矩阵, 记为 $\mathbf{A} \geq 0$ 。

(2) 若 $a_{ij} > 0, \forall i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$, 则称 \mathbf{A} 是正矩阵, 记为 $\mathbf{A} > 0$ 。

(3) 若 $\mathbf{A} \geq 0$, 存在一个 $k \in \mathbf{N}$, 使得 $\mathbf{A}^k > 0$, 则称 \mathbf{A} 是基本矩阵。

(4) 若方阵 \mathbf{A} 可记为 $\begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{R} & \mathbf{T} \end{pmatrix}$ 。其中, \mathbf{C} 和 \mathbf{T} 是方阵。则称 \mathbf{A} 为可约化矩阵。

定义 1.15 对于一个非负的 $n \times n$ 方阵 \mathbf{A} , 若 $\sum_{j=1}^n a_{ij} = 1, \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}$, 则称 \mathbf{A} 为随机矩阵。对于一个随机矩阵 \mathbf{A} , 若它的各行相同, 则称其为稳态矩阵; 若它的每一列都至少有一个元素大于 0, 则称其为列可容矩阵。

定理 1.5 设有随机矩阵 \mathbf{C} 、 \mathbf{M} 和 \mathbf{S} , 其中 \mathbf{M} 是正矩阵, \mathbf{S} 是列可容矩阵, 则乘积 \mathbf{CMS} 是正矩阵。

定理 1.6 设任一有限 Markov 链, 若存在一个正整数 m , 使得 $p_{ij}^{(m)} > 0, \forall i, j \in S$, 则极限 $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^{(n)} = \boldsymbol{\pi}$, 其中, $\boldsymbol{\pi}$ 为一随机矩阵。

定理 1.7 设 \mathbf{P} 为随机正矩阵, 则 $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{P}^k = \mathbf{P}^\infty$, \mathbf{P}^∞ 是一个稳态正矩阵。

定理 1.8 设 \mathbf{P} 是可约化随机矩阵, 其中 \mathbf{C} 是 $m \times m$ 随机正矩阵, 且 $\mathbf{R}, \mathbf{T} \neq \mathbf{0}$ 。则

$$\mathbf{P}^\infty = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{P}^k = \lim_{k \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} \mathbf{C}^k & \mathbf{0} \\ \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{T}^i \mathbf{R} \mathbf{C}^{k-i} & \mathbf{T}^k \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

是一个稳态随机矩阵。

若将某一时刻的种群看作一个状态变量, 则整个状态空间只包含有限个不同的状态。那么整个空间只包含有限个不同的状态。若个体的长度为 l , 种群规模为 n , 则整个状态空间中包含了 $N_s = 2^{l \times n}$ 个不同的状态。进化算法就是通过各种进化算子的作用使得状态变量(种群)以一定的概率在这有限状态空间中演化。在这个意义上, 可以将 EA 过程看作一个有限状态 Markov 链。Goldberg 等^[65]用 Markov 链方法对一种只有变异和复制的遗传算法的收敛性进行了分析。Davis 等^[66]将已有关于模拟退火算法的 Markov 链分析方法推广应用到遗传算法, 并由此证明了遗传算法所生成的 Markov 链是各态历经的。Eiben 等^[67]则提出了一种将遗传算法和模拟退火统一起来的抽象遗传算法, 并且证明了这种算法的全局收敛性。Fogel^[68]则证明了当不使用变异算子时, 遗传算法所生成的 Markov 链将存在吸收态, 在这些吸收态中整个种群都是某个个体的复制, 当时间足够长后, Markov 链必将达到一个吸收态, 此后状态不再发生改变。

3. 公理化模型

徐宗本^[69, 70]提出了一个既可用于分析时齐又可用于分析非时齐遗传算法的公理化模型。这一方法的核心思想是: 通过公理化描述遗传算法的选择算子与重组算子, 并利用所引进的参量分析遗传算法的收敛性。

设 Ω 表示个体空间(因而 Ω^N 是种群空间)。适应值函数 f 被假定在测度空间 (Ω, \mathcal{P}, u) 上考虑, 一个集合 $B \in \mathcal{P}$ 称为 f 的满意集, 如果 $f(a) > f(b)$ 对任何 $a \in B, b \in \Omega \setminus B$

成立。

公理 1.1 一个随机映射 $S: \Omega^N \rightarrow \Omega^N$ 是一个 (抽象) 选择算子, 如果

(1) 对任何 $X \in \Omega^N$, $S(X) \subset X$ 。

(2) X 在正数 β , 使得 $P[|S(X)_M| \geq \beta + |X_M|] > 0$ 。其中, P 表示概率。

$|D|$ 表示集合 D 的基数, $M = \max\{f(x): x \in X\}$, $X_M = \{x \in X: f(x) = M\}$ 。

公理 1.2 随机映射 $E: \Omega^N \rightarrow \Omega^N$ 是一个 (抽象) 演化算子, 如果对 $\forall X \in \Omega^N$, 有:

(1) $P[X = E(X)] > 0$;

(2) 对于任何 $B \in \mathcal{P}$, 如果 $X \cap B = \emptyset$, 则 $P[E(X) \cap B \neq \emptyset] > 0$;

(3) 对于任何 $B \in \mathcal{P}$, 如果 $X \cap B = \emptyset$, 则 $P[E(X) \cap B = \emptyset] = 0$ 。

借助公理 1.2 刻画的选择与演化算子, 定义随机过程

$$X^{(t)} = E(t)S(t)(X^{(t-1)}) \quad (t = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.7)$$

为一抽象模拟演化算法 (abstract evolutionary algorithm, AEA)。其中, $\{E(t)\}$ 和 $\{S(t)\}$ 为一系列演化与选择算子。

定义 1.16 设 S 为一抽象选择算子,

(1) 满足使 $P[|S(X)_M| \geq \beta + |X_M|] > 0$ 成立的最大整数 β 称为 S 的选择压, 记为 S_p 。

(2) 由下式定义的常数 S_1 , 称为选择算子 S 的选择强度

$$S_1 = \inf \left\{ P[|S(x)_M| \geq S_p + |X_M| = 1, X \in \Omega^N] \right\} \quad (1.8)$$

定义 1.17 设 E 为一抽象演化算子, \mathcal{P} 为由所有满意集所组成的集族。

(1) E 的保存率 E_l 定义为 $E_l = \inf \{P[E(X) = X]: X \in \Omega^N\}$;

(2) E 的迁入率 E_e 定义为 $E_e = \inf \{P[E(X) \cap B \neq \emptyset] | X \in \Omega^N, B \in \mathcal{P}, X \cap B \neq \emptyset\}$;

(3) E 的迁出率 E_0^r 定义为 $E_0^r = \sup \{P[E(X) \cap B = \emptyset] | X \in \Omega^N, |X \cap B| = r > 0\}$ 。

利用所引进的参数族, 可直接建立起抽象演化算法 AEA 的收敛性。

定义 1.18 如果对任意满意集 B , $\mu(B) \neq 0$, $\lim_{t \rightarrow \infty} P(X^t \cap B \neq \emptyset) = 1$, AEA 是次收敛的; 如果对任意非零测度满意集 B , $\lim_{t \rightarrow \infty} P(X^t \subset B) = 1$, AEA 是强收敛的。

定理 1.9 在下述条件下, 任何抽象演化算法 AEA 次收敛:

(1) $S_p(t) \geq m > 0$;

(2) $\lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ 1 - [1 - E_0^m(t)] S_1(t) \right\} / E_e(t) = 0$;

(3) $\sum_{t=1}^{\infty} E_e(t) = \infty$ ($E_e(t) \notin l^1$)。

进而, 如果还有

$$\lim_{t \rightarrow \infty} S_t(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} E_t(t) = 1$$

则 AEA 强收敛。

以上所述的公理化模型也可用于其他进化算法（如进化策略）的收敛性分析。

4. Vose-Liepins 模型

这类模型基于 Vose 和 Liepins 的工作^[71~74]。其核心思想是：用两个矩阵算子分别刻画比例选择与组合算子（即杂交算子与变异算子的复合），通过研究这两个算子不动点的存在性与稳定性来刻画遗传算法的渐近行为。

设 L 为遗传算法（二进制）编码长度，则所有可能个体的总数为 $r = 2^L$ ，将它们分别表示为 $\{0, 1, \dots, r-1\}$ ，用 $m_{ij}(k)$ 表示由个体 i, j 通过组合算子的作用获得个体 k 的概率，定义 r 阶矩阵 $\mathbf{M} = (m_{ij}(0))$ 。引进向量 $\Phi^t \in R^r$ ，其第 i 个分量表示个体 i 在第 t 代种群中所占的比例。向量 $S^t \in R^r$ ，其第 i 个分量表示在第 t 代种群中选择个体 i 进行组合的概率。用 \otimes 和 \oplus 分别表示逻辑与和异或运算。

对种群规模无限的二进制编码遗传算法，Vose 和 Liepins 证明：个体 k 在下一代种群中的期望比例为

$$E(\Phi_k^{t+1}) = \sum_{i,j} S_i^t S_j^t m_{i,j}(k) \quad (1.9)$$

其中， E 为数学期望。进而， $m_{i,j}(k \oplus l) = m_{i+k, j+l}(l)$ 。因此只须计算 $m_{i,j}(0)$ ，即可得到 $m_{i,j}(k)$ 对任一 k 的值。

设 f 为待优化的正值适应值函数，定义线性算子 F 为第 (i, i) 项取值 $f(i)$ 的 r 阶对角矩阵，并定义 R^r 上的置换算子 σ_j 为

$$\sigma_j \langle x_0, x_1, \dots, x_{r-1} \rangle^T = \langle x_{j \oplus 0}, x_{j \oplus 1}, \dots, x_{j \oplus (r-1)} \rangle^T \quad (1.10)$$

引进算子 $\varphi: R^r \rightarrow R^r$ ，满足

$$\varphi(x) = \langle (\sigma_0 x)^T M (\sigma_0 x), (\sigma_1 x)^T M (\sigma_1 x), \dots, (\sigma_{r-1} x)^T M (\sigma_{r-1} x) \rangle^T \quad (1.11)$$

借助这些算子，Vose 和 Liepins 证明：下一代种群中各个个体出现的概率为

$$S^{t+1} = \frac{F \varphi(S^t)}{\|F \varphi(S^t)\|_1} \quad (1.12)$$

或等价地，记 $\bar{F}u = Fu / \|Fu\|_1$ ，则 $S^{t+1} = \bar{F} \varphi(S^t)$ 。

显然，利用 Vose-Liepins 模型研究遗传算法收敛性的核心在于刻画非线性算子 $\bar{F} \varphi$ 的不动点集的结构与稳定性，但目前对此尚无一般的结果。

5. 连续（积分算子）模型

大量数值实验表明，为了有效求解高维连续问题和解决遗传算法实现中的效率与稳健性问题，直接使用原问题的浮点表示而不进行编码转换常常有许多优点。

Peck, Dhawan, Qi和Palmieri提出了对于这类连续变量遗传算法收敛性分析的方法^[75-77]。他们将遗传算法看作可行解空间上某些抽样分布的构造与演化,当种群规模趋于无穷时,给出了种群的概率分布所对应的密度函数应满足的递归公式,还给出了保证种群平均适应值单调递增的充分条件。但是这个结果只是在种群规模趋于无穷时迭代序列分布的估计,只能看作是对遗传算法渐近行为的大样本近似。不能直接应用这些结果去研究一般遗传算法的收敛性。

假设定义于 $D \subset R^m$ 上的适应值函数 $f(x)$ 满足 $0 \leq f_{\min} \leq f(x) \leq f_{\max}$ 且 f 仅有有限个全局极大值和不连续点,则在同时使用比例选择及变异算子的情形下有如下定理:

定理 1.10 设变异算子以相同的条件概率密度函数 $g_{w_k}(\cdot|\cdot)$ [$\sup_{x,z \in D} g_{w_k}(x|z) \leq M < \infty$] 独立地作用于第 k 代种群的每个个体,则当种群规模 N 趋于无穷时,遗传算法的演化过程由具有下述递归密度函数的随机向量序列 $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ ($x_k \in D$) 来刻画

$$g_{x_{k+1}}(x) = \frac{\int_D g_{x_k}(y)f(y)g_{w_k}(x|y)dy}{\int_D g_{x_k}(y)f(y)dy} \quad (1.13)$$

考虑满足下述条件的可加变异干扰

$$x_{k+1}^i = x_k^i + w_k^i \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (1.14)$$

其中, $x_k^i = (x_k^{i1}, x_k^{i2}, \dots, x_k^{iN})$ 为选择算子作用于 x_k 后所产生的中间种群状态。若 w_k^i ($1 \leq i \leq N$) 是均值为0的独立同分布 m 维随机向量,且其共同密度函数为 $g_{w_k}(\cdot)$,则此时可用 $g_{w_k}(x-y)$ 代替(1.13)式中的 $g_{w_k}(x|y)$ 。对于这种情形,有如下保证种群平均适应值单调递增的充分条件。

定理 1.11 设目标函数 $f(x)$ 满足 Lipschitz 条件

$$|f(x) - f(y)| \leq L \|x - y\| \quad (\forall x, y \in D) \quad (1.15)$$

变异密度函数 g_{w_k} 球对称,且其平均半径定义为

$$\bar{r}(k, x) = \int_D \|y - x\| g_{w_k}(y - x) dy \quad (1.16)$$

则使种群平均适应值单调递增 $[E(f_{k+1}) \geq E(f_k), f_k = f(x_k)]$ 的充分条件是

$$\int_D f(x) \bar{r}(k, x) g_{w_k}(x) dx \leq \frac{1}{L} \text{var}(f_k) \quad (1.17)$$

可用于分析连续遗传算法的框架与方法均不完善,存在着这样或那样的限制与不足。目前还没有一个好的方法可用于准确描述连续遗传算法的动态行为,并